|  |  |
| --- | --- |
| color_1024x768 | **UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA MARIA****PROGRAMA DE DISCIPLINA** |

 DEPARTAMENTO:

|  |
| --- |
| **QUÍMICA** |

 IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| CÓDIGO | NOME (CARGA HORÁRIA - CRÉDITOS) | CARÁTER |
| **QMC1811** | **Química de Organometálicos dos Elementos de Transição (45-3)** | **Eletiva** |

 EMENTA:

|  |
| --- |
| Aspectos gerais. Ligantes σ-doadores. Ligantes σ-doadores e π-receptores. Ligantes σ e π-doadores e π-receptores. Ligações intermetálicas e formação de clusters. Catálise organometálica. Noções sobre caracterização espectroscópica de organometálicos. |

 PROGRAMA:

|  |
| --- |
| TÍTULO E DISCRIMINAÇÃO DAS UNIDADES |
| UNIDADE 1 – ASPECTOS GERAIS1.1 - Propriedades e tendências das ligações M-C: Polaridade da ligação M-C1.2 - Tipos de ligantes1.3 - Acidez/basicidade de Lewis e teoria de Pearson aplicada a organometálicosUNIDADE 2 – LIGANTES σ-DOADORES2.1 - Síntese de alquilas e arilas de metais de transição2.2 - Propriedades dos organometálicos com σ-doadores2.3 - Estabilidade termodinâmica X labilidade cinética2.4 - Complexos com ligantes perfluoradosUNIDADE 3 – LIGANTES σ-DOADORES E π-RECEPTORES3.1 - Complexos com alquenos3.2 - Complexos com alquinos3.3 - Complexos com carbenos3.4 - Complexos com carbinos3.5 - Carbonilas metálicas: Síntese e estrutura; Complexos carbonílicos com pontes; Teoria do orbital molecular aplicada a carbonilas metálicas; Principais reações das carbonilas metálicas3.6 - Isonitrilas metálicasUNIDADE 4 – LIGANTES σ E π-DOADORES E π-RECEPTORES4.1 - Complexos olefínicos4.2 - Complexos com alquinos4.3 - Complexos alílicos4.4 - Complexos poli-enílicos4.5 - Ligantes cíclicos: Cátions ciclopropenila C3R3+; Ciclobutadieno C4H4; Ânions ciclopentadienila C5H5− |
| 4.6 – Metalocenos: Métodos de síntese; Estrutura eletrônica e ligação; Reações dos metalocenos (Metalocenos carbonílicos, Metalocenos halogenados, Metalocenos e hidretos, Metalocenos nitrosílicos)4.7 - Organometálicos derivados de arenos: Métodos de síntese; Estrutura eletrônica e ligação; Principais reações4.8 - Complexos derivados de C7H7+ e C8H8UNIDADE 5 – LIGAÇÕES INTERMETÁLICAS E FORMAÇÃO DE CLUSTERS5.1 - Critérios para a formação de ligações M-M: Ligações múltiplas M-M5.2 - Estrutura, ligação e contagem de elétrons em clusters5.3 - Analogia isolobal5.4 - Síntese sistemática de clustersUNIDADE 6 – CATÁLISE ORGANOMETÁLICA6.1 - Contagem de elétrons e catálise6.2 - Hidrogenação de alquenos6.3 - Hidroformilação6.4 - Síntese do ácido acético: processos Monsanto e Cativa6.5 - Reações de acoplamento: Reação de Heck; Reação de Suzuki; Reação de Sonogashira; Reação de Stille6.6 - Processo Wacker6.7 - Metátese de olefinas6.8 - Reações de Fischer-Tropsch6.9 - Oligomerização e polimerização6.10 - Reforma de gás d’água6.11 - Carbonilação de Reppe UNIDADE 7 – NOÇÕES SOBRE CARACTERIZAÇÃO ESPECTROSCÓPICA DE ORGANOMETÁLICOS7.1 - Espectroscopia vibracional de carbonilas metálicas7.2 - RMN de 1H e 13C em organometálicos7.3 - RMN de metais de transição em complexos organometálicosUNIDADE 8 – AVANÇOS RECENTES EM QUÍMICA ORGANOMETÁLICA8.1 - Ligantes hemilábeis8.2 - Ativação da ligação C-H em alcanos8.3 - Catálise assimétrica |

 BIBLIOGRAFIA:

|  |
| --- |
| BIBLIOGRAFIA BÁSICA E COMPLEMENTAR |
| ELSCHENBROICH, C.; **Organometallics**, 3rd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, 2006.MIESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR, D. A.; **Química Inorgânica**, 5a Ed., Pearson, São Paulo, 2014.SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Bookman, Porto Alegre, 2008.TOMA, H. E.; **Coleção de Química Conceitual: Química de Coordenação, Organometálica e Catálise**, Vol. 4, Blucher, São Paulo, 2013.HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G.; **Química Inorgânica**, 4ª Ed., Vol. 1 e 2, LTC, Rio de Janeiro, 2013.CRABTREE, R. H.; **The Organometallic Chemistry of the Transition Metals**, 4th Ed., Wiley, New York, 2005.SPESSARD, G. O.; MIESSLER, G. L.; **Organometallic Chemistry**, 2nd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2010.HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L.; **Inorganic Chemistry - Principles of Structure and Reactivity**, 4th Ed., Harper Collins College Publishers, New York, 1993.DOUGLAS, B.; McDANIEL, D.; ALEXANDER, J.; **Concepts and Models of Inorganic Chemistry**, 3rd Ed., Wiley, New York, 1994.KETTLE, S. F. A.; **Physical Inorganic Chemistry: A Coordination Chemistry Approach**, Oxford University Press, Oxford, 2000.ATKINS, P. W.; OVERTON, T.; ROURKE, J.; WELLER, M.; ARMSTRONG, F.; HAGERMAN, M.; **Shriver & Atkins’ Inorganic Chemistry**, 5th Ed., OUP Oxford, Oxford, 2009.JORDAN, R. B.; **Reaction Mechanisms of Inorganic and Organometallic Systems**, 3rd Ed., Oxford University Press, Oxford, 2007.YAMAMOTO, A.; **Organotransition Metal Chemistry**, Wiley, New York, 1986.DUPONT, J.; **Química Organometálica: Elementos do Bloco d**, Bookman, Porto Alegre, 2005.Artigos científicos recentes sobre o tema publicados em periódicos da área. |
| Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Coordenador do Curso | Data: \_\_\_\_/\_\_\_\_/\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Chefe do Departamento |